Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

М. Гнатич, Ю. Хонконен, Т. Лучивянки, Теоретико-полевой подход к описанию кинетических реакций. Роль случайных источников и стоков, *ТМФ*, 2011, том 169, номер 1, 146–157

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6716>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 3.81.55.215

26 апреля 2023 г., 15:32:46

© 2011 г. М. Гнатич^{*†}, Ю. Хонконен[‡], Т. Лучивянский^{*†}

ТЕОРЕТИКО-ПОЛЕВОЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ КИНЕТИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ. РОЛЬ СЛУЧАЙНЫХ ИСТОЧНИКОВ И СТОКОВ

В рамках теоретико-полевой модели, полученной путем вторичного квантования управляющего уравнения типа Дои, исследовано влияние случайных источников и стоков на кинетику реакций в описании управляющего уравнения. Показано, что случайные источники и стоки оказывают существенное влияние на асимптотическое поведение модели, и при их описании с помощью масштабного анализа удается выделить два класса универсальности. Результаты сравниваются с описанием того же процесса в терминах уравнения Ланжевена.

Ключевые слова: ренормализационная группа, кинетика реакций, случайные источники и стоки, размерный анализ, эффективное действие.

1. ВВЕДЕНИЕ

Кинетика реакций – основной предмет нашего анализа – описывается как распространяющийся процесс, привлекающий к себе в последнее время пристальное внимание ввиду его частого возникновения в физических, химических, биологических, экологических и социологических системах. Флуктуации различных величин в таких системах обычно описываются в терминах функций распределения вероятности для плотностей реагентов, удовлетворяющих подходящим управляющим уравнениям. С помощью элегантной техники Дои [1] решения этих уравнений можно выразить в терминах модели квантовой теории поля, которая в своем функционально-интегральном виде определяет эффективную теоретико-полевою модель, задаваемую набором определяющих управляющих уравнений. Этот результат напоминает теоретико-полевою модель критической динамики, полученную из уравнения Ланжевена [2] в рамках подхода Мартина–Сиггиа–Розе. В уравнении Ланжевена случайное поле получает добавки, компенсирующие потери, вносимые

^{*}Institute of Experimental Physics, Slovak Academy of Sciences, Košice, Slovakia.
E-mail: hnatic@saske.sk, lucivjansky@saske.sk

[†]Faculty of Sciences, P.J.Šafarik University, Košice, Slovakia

[‡]Department of Military Technology, National Defence University, Helsinki, Finland.
E-mail: juha.honkonen@helsinki.fi

диссипацией и реакциями, и тем самым восстанавливает стабильное состояние динамики системы. В кинетике реакций случайные источники и стоки отражают реальную физическую ситуацию, в которой в процессе химических реакций появление и исчезновение частиц связано с неконтролируемым случайным взаимодействием с термостатом, т.е. с активными химическими радикалами. Интерпретация случайных полей как физических источников и стоков в уравнении Ланжевена несколько противоречива. Поэтому в настоящей работе производится анализ альтернативного подхода, основанного на управляющем уравнении, в которое включены члены, ответственные за взаимодействие с термостатом.

Мы следуем здесь идеям монографии [3] и описываем случайные источники и стоки в терминах новых реакций рождения и уничтожения в управляющем уравнении для одночастичных реакций аннигиляции. В простейшем случае число частиц не сохраняется, что не позволяет сравнить наши результаты с результатами стандартного подхода Ланжевена. Введение несколько усложненного набора реакций рождения и уничтожения позволяет добиться сохранения числа частиц, что позволяет сравнивать полученные ответы с результатами для стандартного мультипликативного шума в уравнении Ланжевена.

Работа организована следующим образом. В разделе 2 формулируется общий формализм управляющего уравнения для реакции аннигиляции со случайными источниками и стоками. Там же приводятся основные отличительные черты формализма Дои и строится теоретико-полевой функционал динамического действия. В разделе 3 приведен масштабный анализ динамического действия, а раздел 4 содержит обсуждение и заключительные замечания.

2. СЛУЧАЙНЫЕ ИСТОЧНИКИ И СТОКИ В УПРАВЛЯЮЩЕМ УРАВНЕНИИ

Рассмотрим реакцию аннигиляции $A + A \rightarrow \emptyset$ в поле случайных блужданий в более общей постановке задачи по сравнению с работой [4]. Для этого введем случайные источники и стоки частиц, обеспечивающие наличие в системе стабильных состояний. В большинстве подходов это обеспечивается включением дополнительного шумового члена в уравнение Ланжевена для стохастического процесса. Поскольку наш анализ основан на применении управляющего уравнения, такая процедура не вполне оправдана. К сожалению, не существует единственного способа введения случайных источников в управляющее уравнение, отвечающее случайному шуму, в описании среднего поля Ланжевена. Мы использовали простейший выбор, описанный в деталях, например, в монографии [3], который эквивалентен добавлению в систему реакций $A \rightarrow X$ и $Y \rightarrow A$, где через X и Y обозначены термостаты (ванны) частиц для соответствующих стока и источника. В однородной системе включение этих реакций приводит к возникновению управляющих уравнений

$$\frac{dP(t, n)}{dt} = \mu_+ V [P(t, n-1) - P(t, n)] + \mu_- [(n+1)P(t, n+1) - nP(t, n)] + \dots, \quad (1)$$

где $P(t, n)$ – вероятность обнаружения n частиц в системе в момент времени t . Многоточием в формуле (1) обозначены члены, описывающие реакцию уничтожения, диффузию и адвекцию в системе. В формуле (1) величины μ_+ и μ_- суть константы реакции для соответствующих процессов рождения и уничтожения. Интенсивность

перехода выбрана пропорциональной числу частиц n , что представляется естественным предположением, а также сохраняет пустое состояние в качестве абсорбирующего. В интенсивности перехода для процесса рождения величина V представляет собой объем (пока еще) однородной системы, который оказывается существенным параметром при переходе к непрерывному пределу для неоднородной системы. Напомним, что управляющее уравнение (1) приводит к уравнению для интенсивности реакции

$$\frac{d\langle n \rangle}{dt} = \mu_+ V - \mu_- \langle n \rangle + \dots, \quad (2)$$

где $\langle n \rangle$ – среднее число частиц.

Идея подхода Дои [1] состоит в переписывании системы управляющих уравнений для распределения вероятности стохастической задачи в виде единственного кинетического уравнения для вектора состояния, включающего в себя всю вероятностную информацию о системе, построенной над подходящим пространством Фока. Кинетическое уравнение задается оператором Лиувилля, действующим в пространстве Фока и порождаемым системой управляющих уравнений. Хотя эта процедура в целом была достаточно полно отражена в литературе, введение случайных источников и стоков имеет свои отличительные особенности, которые сто́ит рассмотреть более детально. Поэтому напомним кратко основные свойства и соотношения, характерные для подхода Дои. Для простоты рассмотрим вероятности $P(t, n)$ обнаружения n частиц в момент времени t в фиксированном узле решетки. Пространственную зависимость при этом можно описать, поставив число частиц в зависимость от координат решетки и вводя необходимые суммирования и произведения по узлам решетки.

Базисные векторы пространства Фока задаются обычными операторами уничтожения и рождения $\hat{a}$, $\hat{a}^+$ и вакуумным вектором $|0\rangle$:

$$\hat{a}|0\rangle = 0, \quad \hat{a}^+|n\rangle = |n+1\rangle, \quad (3)$$

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = I, \quad (4)$$

с нормировкой $\langle n | m \rangle = n! \delta_{nm}$, I – единичный оператор.

Вектор состояния, содержащий всю информацию о системе, определен следующим образом:

$$|\Phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} P(t, n) |n\rangle. \quad (5)$$

Систему управляющих уравнений для процессов рождения и уничтожения можно представить в виде единственного эволюционного уравнения для вектора состояния (5) без какой-либо явной зависимости от чисел заполнения:

$$\frac{d|\Phi\rangle}{dt} = \hat{L}(\hat{a}^+, \hat{a})|\Phi\rangle. \quad (6)$$

Управляющие уравнения (1) приводят к следующим членам в операторе Лиувилля:

$$\hat{L}_g(\hat{a}^+, \hat{a}) = \mu_+ V(\hat{a}^+ - I) + \mu_- (I - \hat{a}^+) \hat{a}. \quad (7)$$

Математическое ожидание любой функции $F(n)$ от случайного числа частиц

$$\langle F(t) \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} F(n) P(t, n) \quad (8)$$

может быть представлено в виде функционального интеграла по функциям времен $\tilde{a}$ и a :

$$\langle F(t) \rangle = \int \mathcal{D}\tilde{a} \mathcal{D}a F_N[(\tilde{a}(t) + 1)a(t)] e^{S_1}, \quad (9)$$

где через $F_N(\tilde{a}a)$ обозначена нормальная форма записи [5] оператора $F(\hat{a}^+ \hat{a})$, а S_1 представляет собой динамическое действие:

$$S_1(\tilde{a}, a) = \int_0^\infty dt [-\tilde{a}(t) \partial_t a(t) + \mu_+ V \tilde{a}(t) - \mu_- \tilde{a}(t) a(t)] + \dots \quad (10)$$

Здесь явно выписаны только член общего вида с производной по времени и члены, возникающие в модели со случайным источником; многоточием заменены члены, отвечающие другим реакциям и начальным условиям.

Пусть интенсивности перехода $\mu_\pm$ представляют собой случайные функции, не коррелированные по времени, распределения вероятности которых задаются в терминах моментов $\langle \mu_\pm^n \rangle = E_{\pm, n}$. Здесь рассмотрение обобщается на случай пространственно неоднородной системы, и в качестве пространственного аргумента вводится решеточный индекс, т. е. $a(t) \rightarrow a_i(t)$. В этом случае объемный фактор V приобретает смысл элемента объема, связанного с узлом решетки. Для простоты заменим временной интервал интегральной суммой, $\int_0^\infty dt \rightarrow \sum_\alpha \Delta t$, и будем предполагать, что интенсивности перехода $\mu_{\pm, \alpha, i}$ в каждый момент времени и в каждом узле решетки представляют собой независимые случайные величины. Тогда вычисление среднего от математического ожидания (9) относительно распределения случайных источников сводится к нахождению математического ожидания

$$\prod_{\alpha, i} \langle \exp(\mu_{+, \alpha, i} V \tilde{a}_{\alpha, i} \Delta t - \mu_{-, \alpha, i} \tilde{a}_{\alpha, i} a_{\alpha, i} \Delta t) \rangle. \quad (11)$$

В каждый отдельный момент времени и в каждом узле решетки (предполагается, что моменты величин $\mu_\pm$ совпадают для всех α и i , и мы опускаем индексы для краткости записи) получим обычное кумулянтное разложение

$$\begin{aligned} \langle e^{\mu b \Delta t} \rangle &= 1 + b \Delta t E_1 + \frac{1}{2} E_2 (b \Delta t)^2 + \frac{1}{6} E_3 (b \Delta t)^3 + \dots = \\ &= \exp \left[b \Delta t E_1 + \frac{1}{2} (E_2 - E_1^2) (b \Delta t)^2 + \frac{1}{6} (E_3 - 3 E_1 E_2 + E_1^3) (b \Delta t)^3 + \dots \right], \end{aligned} \quad (12)$$

где через b обозначена или величина $V \tilde{a}$, или $-\tilde{a}a$. Таким образом, например, среднее по μ_+ принимает вид

$$\begin{aligned} \prod_{\alpha, i} \langle \exp(\mu_{+, \alpha, i} V \tilde{a}_{\alpha, i} \Delta t) \rangle &= \exp \left\{ \sum_\alpha \sum_i \left[\Delta t E_{+1} V \tilde{a}_{\alpha, i} + \frac{1}{2} (E_{+2} - E_{+1}^2) (V \tilde{a}_{\alpha, i} \Delta t)^2 \right] \right\} \times \\ &\times \exp \left\{ \sum_\alpha \sum_i \left[\frac{1}{6} (E_{+3} - 3 E_{+1} E_{+2} + E_{+1}^3) (V \tilde{a}_{\alpha, i} \Delta t)^3 + \dots \right] \right\}. \end{aligned} \quad (13)$$

В непрерывном пределе функция $\tilde{a}_{\alpha, i}$ заменяется на поле $\psi^+(t, \mathbf{x})$, в то время как в пределе $V \rightarrow 0$ из выражения $a_{\alpha, i}/V$ получается поле $\psi(t, \mathbf{x})$. Суммирование по α с весом Δt переходит в интеграл по времени, а из суммирования по i , взвешенного

с элементом объема, получается пространственный интеграл: $\sum_i V \rightarrow \int d\mathbf{x}$. Для первого члена в показателе экспоненты в правой части формулы (13) получим

$$\sum_{\alpha} \sum_i \Delta t E_{+1} V \tilde{a}_{\alpha,i} \rightarrow E_{+1} \int dt \int d\mathbf{x} \psi^+(t, \mathbf{x}).$$

В кумулянтах второго и старших порядков результат применения непрерывного предела не столь очевиден. Для величин $\mu_{\pm}$ будем предполагать простейшее нетривиальное распределение, в котором только дисперсионный член имеет ненулевой предел при $\Delta t \rightarrow 0$ и $V \rightarrow 0$, а вклады кумулянтов старших порядков обращаются в нуль, например

$$(E_{+2} - E_{+1}^2) V \Delta t \rightarrow \sigma_+, \quad \Delta t \rightarrow 0, \quad V \rightarrow 0, \quad (14)$$

$$(E_{+3} - 3E_{+1}E_{+2} + E_{+1}^3)(V\Delta t)^2 \rightarrow 0, \quad \Delta t \rightarrow 0, \quad V \rightarrow 0. \quad (15)$$

Вклад среднего по полю μ_+ в эффективное динамическое действие, таким образом, принимает вид

$$S_+ = \int dt \int d\mathbf{x} \left\{ E_{+1} \psi^+(t, \mathbf{x}) + \frac{1}{2} \sigma_+ [\psi^+(t, \mathbf{x})]^2 \right\}. \quad (16)$$

Для среднего по полю μ_- с помощью аналогичных рассуждений получим

$$S_- = \int dt \int d\mathbf{x} \left\{ -E_{-1} \psi^+(t, \mathbf{x}) \psi(t, \mathbf{x}) + \frac{1}{2} \sigma_- [\psi^+(t, \mathbf{x}) \psi(t, \mathbf{x})]^2 \right\}. \quad (17)$$

Такие вклады в эффективное динамическое действие можно, разумеется, получить с помощью специально подобранных нормальных распределений величин $\mu_{\pm}$.

Такой способ введения случайных источников и стоков обладает тем неприятным свойством, что в нем не сохраняется число частиц в системе. Чтобы сравнить полученный результат с результатом подхода Ланжевена, необходимо ввести случайные источники и стоки таким образом, чтобы обеспечить сохранение числа частиц.

Простейший способ добиться этого состоит в добавлении к случайному источнику члена, пропорционального числу частиц, т. е. в применении в управляющем уравнении *константы реакции* $\mu_+ V + \mu_{1+} n$ вместо $\mu_+ V$. Члены с источниками в правой части управляющего уравнения (1) в этом случае принимают следующий вид:

$$\frac{dP(t, n)}{dt} = \mu_+ V [P(t, n-1) - P(t, n)] + \mu_{1+} [(n-1)P(t, n-1) - nP(t, n)] + \dots \quad (18)$$

Новые члены в управляющем уравнении отвечают процессу ветвления [3].

Добавленные члены задают следующий вклад в оператор Лиувилля:

$$\hat{L}_{g2}(\hat{a}^+, \hat{a}) = \mu_{1+}(\hat{a}^+ - I)\hat{a}^+ \hat{a}. \quad (19)$$

Производя преобразования, описанные выше, получим вклад в динамическое действие вида

$$S_{1+} = \int dt \int d\mathbf{x} \left\{ E_{1+1} \psi^+ (\psi^+ + 1) \psi + \frac{1}{2} \sigma_{1+} (\psi^+)^2 (\psi^+ + 1)^2 \psi^2 \right\}. \quad (20)$$

Теперь легко видеть, что в случае, когда простой источник исключается (т.е. налагается условие $E_{+1} = \sigma_+ = 0$) и выбирается $E_{1+1} = E_{-1}$, пустое состояние остается абсорбирующим, а “массовый член”, пропорциональный $\psi^+ \psi$, пропадает в динамическом действии, и в итоге получается следующее динамическое действие случайных источников и стоков:

$$S_{gc} = \int dt \int d\mathbf{x} \left\{ E_{1+1} (\psi^+)^2 \psi + \frac{1}{2} \sigma_- (\psi^+ \psi)^2 + \frac{1}{2} \sigma_{1+} (\psi^+)^2 (\psi^+ + 1)^2 \psi^2 \right\}, \quad (21)$$

в котором среднее число частиц сохраняется.

Влияние членов старших порядков оказывается совершенно разным в двух случаях, в которых масштабный анализ с помощью ренормализационной группы оказывается возможным. Член с производной по времени в динамическом действии

$$S = - \int dt \int d\mathbf{x} \psi^+ (t, \mathbf{x}) \partial_t \psi(t, \mathbf{x}) + \dots$$

может обладать нетривиальной динамикой только в случае, если он безразмерен. Поэтому полная скейлинговая размерность оператора плотности числа частиц $\psi^+ (t, \mathbf{x}) \psi(t, \mathbf{x})$ должна быть равна размерности пространства и потому является положительной.

Во-первых, если масштабная размерность поля ψ^+ равна нулю, $d_{\psi^+} = 0$, то размерность поля ψ положительна (более точно, $d_{\psi} = d$), и операторные мономы во втором и третьем членах в выражении (21) имеют одну и ту же масштабную размерность. Поскольку они содержат множитель ψ^2 , их масштабная размерность превышает размерность произведения операторов $(\psi^+)^2 \psi$. Поэтому второй и третий члены в формуле (21) ИК-несущественны, и их следует опустить при проведении асимптотического анализа. Во-вторых, если масштабные размерности обоих полей положительны, то в операторных мономах во втором и третьем слагаемых в выражении (21) присутствует по крайней мере один “лишний” полевой множитель по сравнению с первым членом, что делает эти члены несущественными. Поэтому в указанных случаях ИК-существенное динамическое действие случайных источников и стоков сводится к одному единственному члену

$$S'_{gc} = \int dt \int d\mathbf{x} E_{1+1} (\psi^+)^2 \psi, \quad d_{\psi^+} = 0 \vee d_{\psi^+} > 0, \quad d_{\psi} > 0. \quad (22)$$

В-третьих, если масштабная размерность поля ψ обращается в нуль, то масштабная размерность поля ψ^+ оказывается положительной, члены с “лишними” степенями поля ψ^+ становятся ИК-несущественными и отправной точкой последующего ренормгруппового анализа становится действие источников и стоков вида

$$S''_{gc} = \int dt \int d\mathbf{x} \left\{ E_{1+1} (\psi^+)^2 \psi + \frac{1}{2} (\sigma_- + \sigma_{1+}) (\psi^+ \psi)^2 \right\}, \quad d_{\psi} = 0. \quad (23)$$

3. РЕАКЦИЯ АННИГИЛЯЦИИ $A + A \rightarrow \emptyset$ СО СЛУЧАЙНЫМИ ИСТОЧНИКАМИ И СТОКАМИ

Проведем теперь анализ динамического действия реакции аннигиляции, ограниченной диффузией, $A + A \rightarrow \emptyset$

$$S_1 = - \int_0^\infty dt \int d\mathbf{x} \{ \psi^+ \partial_t \psi - D_0 \psi^+ \nabla^2 \psi + \\ + \lambda_0 D_0 [2\psi^+ + (\psi^+)^2] \psi^2 \} + n_0 \int d\mathbf{x} \psi^+(\mathbf{x}, 0) \quad (24)$$

с точки зрения скейлингового поведения, описанного в разделе 2.

В первом случае, когда $d_{\psi^+} = 0$, нелинейные члены в действии (24) имеют одинаковые скейлинговые размерности. Но часть действия (22), описывающая взаимодействие с источником и стоком, линейна относительно поля ψ , имеющего положительную скейлинговую размерность, в отличие от членов, квадратичных по полю ψ , в действии (24). Тем самым ИК-значимое взаимодействие в размерности $d > 2$ задается формулой (22), и соответствующее динамическое действие имеет вид

$$S_{\text{IR1}} = - \int_0^\infty dt \int d\mathbf{x} \{ \psi^+ \partial_t \psi - D_0 \psi^+ \nabla^2 \psi - E_{1+1} (\psi^+)^2 \psi \} + n_0 \int d\mathbf{x} \psi^+(\mathbf{x}, 0). \quad (25)$$

Это динамическое действие не приводит к появлению графов с замкнутыми петлями пропагатора плотности, что на первый взгляд предполагает отсутствие флуктуационных эффектов. Однако масштабная размерность члена взаимодействия отрицательна и может компенсировать положительные размерности несущественных членов взаимодействия. Поэтому отброшенные члены взаимодействия представляют собой опасные несущественные операторы, а потому в данном случае не удастся достичь надежного заключения относительно вида настоящего ИК-эффективного действия на основе анализа масштабных размерностей.

Во втором случае, когда $d_{\psi^+} > 0$ и $d_\psi > 0$, член четвертого порядка в действии (24) становится несущественным. Каждый из оставшихся членов третьего порядка по отдельности не порождает петель, а потому эффекты флуктуаций плотности могут возникнуть только в том случае, когда оба поля имеют одну и ту же скейлинговую размерность $d_{\psi^+} = d_\psi = d/2$. В этом случае ИК-существенное динамическое действие имеет вид

$$S_{\text{IR2}} = - \int_0^\infty dt \int d\mathbf{x} \{ \psi^+ \partial_t \psi - D_0 \psi^+ \nabla^2 \psi + \\ + 2\lambda_0 D_0 \psi^+ \psi^2 - E_{1+1} (\psi^+)^2 \psi \} + n_0 \int d\mathbf{x} \psi^+(\mathbf{x}, 0). \quad (26)$$

Здесь масштабная размерность обоих членов взаимодействия равна $(d/2) - 2$ и обращается в нуль в критической размерности $d_c = 4$, в которой размерности всех прочих членов взаимодействия становятся положительными, а потому эти члены несомненно оказываются несущественными. Эффективное действие (26) представляет собой динамическое действие для грибовского процесса [6], также известное как модель реджеона. В этом случае эффекты случайного блуждания были изучены в работе [7] с применением поля скоростей сжимаемой среды Обухова–Крейчмана.

В третьем случае, когда $d_\psi = 0$, член четвертого порядка в действии (24) также становится несущественным в силу положительности размерности поля ψ^+ . Но по той же причине при этом оба члена в действии источника–стока (23) также оказываются несущественными, и результирующее ИК-существенное действие принимает вид

$$S_{\text{IR3}} = - \int_0^\infty dt \int d\mathbf{x} \{ \psi^+ \partial_t \psi - D_0 \psi^+ \nabla^2 \psi + 2\lambda_0 D_0 \psi^+ \psi^2 \} + n_0 \int d\mathbf{x} \psi^+(\mathbf{x}, 0). \quad (27)$$

С помощью рассуждений, аналогичных примененным при получении выражения (25), можно показать, что скейлинговый анализ при таком выборе полевых размерностей не позволяет разрешить вопрос о существенности тех или иных членов взаимодействия. Следует подчеркнуть, что масштабные размерности на самом деле – вспомогательные величины, и асимптотическое поведение индивидуальных графов зависит от выбора величин полевых размерностей. Тем самым эффективное действие (26) с однозначной классификацией существенных и несущественных членов описывает критическое масштабное поведение, приведенное к виду, совместному с ренормгрупповым анализом.

Подводя итог, отметим, что если источники и стоки выбираются таким образом, чтобы в системе сохранялось среднее число частиц, то аномальное скейлинговое поведение системы совпадает с таким же поведением для грибовского процесса.

Другая ситуация возникает, если включить в рассмотрение член простого источника. Тогда появляется возможность того, что система стремится не к абсорбирующему пустому состоянию, а к активному состоянию с конечной концентрацией частиц. В этом случае отправной точкой служит динамическое действие со всеми членами, отмеченными выше, т. е.

$$\begin{aligned} S = \int_0^\infty dt \int d\mathbf{x} \Big\{ & -\psi^+ \partial_t \psi + D_0 \psi^+ \nabla^2 \psi - \lambda_0 D_0 [2\psi^+ + (\psi^+)^2] \psi^2 + E_{+1} \psi^+ + \\ & + \frac{1}{2} \sigma_+ (\psi^+)^2 + E_{1+1} \psi^+ (\psi^+ + 1) \psi + \frac{1}{2} \sigma_{1+} (\psi^+)^2 (\psi^+ + 1)^2 \psi^2 - E_{-1} \psi^+ \psi + \\ & + \frac{1}{2} \sigma_- (\psi^+ \psi)^2 \Big\} + n_0 \int d\mathbf{x} \psi^+(\mathbf{x}, 0). \end{aligned} \quad (28)$$

Уравнение стационарности, обусловленное этим динамическим действием для поля ψ , имеет вид (как и в обычном случае, стационарное значение $\psi^+ = 0$)

$$\partial_t \psi - D_0 \nabla^2 \psi = -2\lambda_0 D_0 \psi^2 + E_{+1} + E_{1+1} \psi - E_{-1} \psi. \quad (29)$$

Однако действие, разложенное в окрестности стационарного значения для этого уравнения, оказывается весьма сложным. Чтобы упростить выражения, продолжим рассматривать случай $E_{1+1} = E_{-1}$. Тогда вновь разложенное действие принимает вид

$$\begin{aligned} S = \int_0^\infty dt \int d\mathbf{x} \Big\{ & -\psi^+ \partial_t \psi + D_0 \psi^+ \nabla^2 \psi - \sqrt{8} \sqrt{E_{+1} \lambda_0 D_0} \psi^+ \psi + \\ & + \left(-\frac{E_{+1}}{2} + \frac{E_{-1} \sqrt{E_{+1} \lambda_0 D_0}}{\sqrt{2} \lambda_0 D_0} + \frac{E_{+1} \sigma_{1+}}{4 \lambda_0 D_0} + \frac{E_{+1} \sigma_-}{4 \lambda_0 D_0} + \frac{\sigma_+}{2} \right) (\psi^+)^2 + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{E_{+1}\sigma_{1+}(\psi^+)^3}{2\lambda_0 D_0} + \frac{E_{+1}\sigma_{1+}(\psi^+)^4}{4\lambda_0 D_0} + \frac{\sqrt{2}\sqrt{E_{+1}\lambda_0 D_0}\sigma_{1+}(\psi^+)^3\psi}{\lambda_0 D_0} + \\
& + \left(E_{-1} - \sqrt{2}\sqrt{E_{+1}\lambda_0 D_0} + \frac{\sqrt{E_{+1}\lambda_0 D_0}\sigma_{1+}}{\sqrt{2}\lambda_0 D_0} + \frac{\sqrt{E_{+1}\lambda_0 D_0}\sigma_-}{\sqrt{2}\lambda_0 D_0} \right) (\psi^+)^2\psi + \\
& + \frac{\sqrt{E_{+1}\lambda_0 D_0}\sigma_{1+}(\psi^+)^4\psi}{\sqrt{2}\lambda_0 D_0} - 2\lambda_0 D_0 \psi^+ \psi^2 + \left(-\lambda_0 D_0 + \frac{\sigma_{1+}}{2} + \frac{\sigma_-}{2} \right) (\psi^+)^2 \psi^2 + \\
& + \sigma_{1+}(\psi^+)^3 \psi^2 + \frac{\sigma_{1+}(\psi^+)^4 \psi^2}{2} \Big\} + n_0 \int d\mathbf{x} \psi^+(\mathbf{x}, 0). \tag{30}
\end{aligned}$$

В критическом режиме имеем $E_{+1} \rightarrow 0$. Поскольку эта величина представляет собой математическое ожидание неотрицательной случайной величины μ_+ , дисперсия σ_+ также обращается в нуль. В окрестности критической точки будем удерживать только ведущий член E_{+1} и дисперсию σ_+ , полагая их равными нулю в первых поправочных членах. Это существенно упрощает вид действия, и мы получим

$$\begin{aligned}
S = & \int_0^\infty dt \int d\mathbf{x} \left\{ -\psi^+ \partial_t \psi + D_0 \psi^+ \nabla^2 \psi - \sqrt{8}\sqrt{E_{+1}\lambda_0 D_0} \psi^+ \psi + \right. \\
& + \left(\frac{E_{-1}\sqrt{E_{+1}}}{\sqrt{2}\lambda_0 D_0} + \frac{\sigma_+}{2} \right) (\psi^+)^2 + \frac{E_{+1}\sigma_{1+}(\psi^+)^3}{2\lambda_0 D_0} + \frac{E_{+1}\sigma_{1+}(\psi^+)^4}{4\lambda_0 D_0} + E_{-1}(\psi^+)^2 \psi + \\
& + \frac{\sqrt{2}\sqrt{E_{+1}\lambda_0 D_0}\sigma_{1+}(\psi^+)^3\psi}{\lambda_0 D_0} + \frac{\sqrt{E_{+1}\lambda_0 D_0}\sigma_{1+}(\psi^+)^4\psi}{\sqrt{2}\lambda_0 D_0} - 2\lambda_0 D_0 \psi^+ \psi^2 + \\
& + \left(-\lambda_0 D_0 + \frac{\sigma_{1+}}{2} + \frac{\sigma_-}{2} \right) (\psi^+)^2 \psi^2 + \sigma_{1+}(\psi^+)^3 \psi^2 + \frac{\sigma_{1+}(\psi^+)^4 \psi^2}{2} \Big\} + \\
& + n_0 \int d\mathbf{x} \psi^+(\mathbf{x}, 0). \tag{31}
\end{aligned}$$

Анализ канонических размерностей при этом выделяет следующие возможные варианты. Для нелинейных слагаемых, не содержащих критических параметров E_{+1} и σ_+ , можно применить те же рассуждения, что и выше, но для слагаемых, содержащих в качестве коэффициентов степени этих параметров, необходимо учесть их положительные скейлинговые размерности. Из свободной полевой части действия (31) следует, что каноническая размерность поля E_{+1} равна 4. Каноническая размерность поля σ_+ остается при этом свободным параметром.

Продолжая рассуждения, аналогичные приведенным выше, получим следующие эффективные действия в ИК-скейлинговом пределе. В первом случае, когда $d_{\psi^+} = 0$, члены с третьей и четвертой степенями поля ψ^+ или не содержат поля ψ , или зависят от него линейно, поскольку коэффициенты, пропорциональные E_{+1} или $\sqrt{E_{+1}}$, несущественны по сравнению с членами, пропорциональными $(\psi^+)^2$ в действии (31). Члены, нелинейные по ψ , несущественны по сравнению с линейными членами, поскольку масштабная размерность поля ψ положительна. Поэтому ИК-эффективное действие в этом случае имеет вид

$$\begin{aligned}
S = & \int_0^\infty dt \int d\mathbf{x} \left\{ -\psi^+ \partial_t \psi + D_0 \psi^+ \nabla^2 \psi - 2\sqrt{2}\sqrt{E_{+1}\lambda_0 D_0} \psi^+ \psi + \right. \\
& + \left(\frac{E_{-1}\sqrt{E_{+1}}}{\sqrt{2}\lambda_0 D_0} + \frac{\sigma_+}{2} \right) (\psi^+)^2 + E_{-1}(\psi^+)^2 \psi \Big\} + n_0 \int d\mathbf{x} \psi^+(\mathbf{x}, 0). \tag{32}
\end{aligned}$$

Снова член взаимодействия, остающийся после выполнения формального размерного анализа, не приводит к появлению петель, хотя корреляционная функция поля ψ становится нетривиальной. Однако, поскольку масштабная размерность этого члена оказывается отрицательной, несущественные члены могут оказаться опасными, что не позволяет сделать никакого определенного заключения относительно значимости индивидуальных членов взаимодействия.

Во втором случае, когда $d_{\psi^+} > 0$ и $d_\psi > 0$, все степени полей, превышающие степени ведущих поправок к свободной части действия по обоим полям, оказываются несущественными. Отсюда получим динамическое действие

$$S = \int_0^\infty dt \int d\mathbf{x} \left\{ -\psi^+ \partial_t \psi + D_0 \psi^+ \nabla^2 \psi - 2\sqrt{2} \sqrt{E_{+1} \lambda_0 D_0} \psi^+ \psi + \left(\frac{E_{-1} \sqrt{E_{+1}}}{\sqrt{2\lambda_0 D_0}} + \frac{\sigma_+}{2} \right) (\psi^+)^2 + E_{-1} (\psi^+)^2 \psi - 2\lambda_0 D_0 \psi^+ \psi^2 \right\} + n_0 \int d\mathbf{x} \psi^+(\mathbf{x}, 0). \quad (33)$$

В противоположность первому случаю, здесь член взаимодействия $-2\lambda_0 D_0 \psi^+ \psi^2$ порождает петли сам по себе ввиду наличия у поля ψ нетривиальной корреляционной функции. Таким образом, в этом случае возможны оба варианта эффективного действия с нетривиальными вкладами флуктуаций.

1. Случай $d_{\psi^+} > d_\psi$. Чтобы сохранить нетривиальную корреляционную функцию поля ψ в петлях, размерность дисперсии σ_+ должна быть меньше размерности поля $\sqrt{E_{+1}}$. Отсюда получается эффективное действие вида

$$S = \int_0^\infty dt \int d\mathbf{x} \left\{ -\psi^+ \partial_t \psi + D_0 \psi^+ \nabla^2 \psi - 2\sqrt{2} \sqrt{E_{+1} \lambda_0 D_0} \psi^+ \psi + \frac{\sigma_+}{2} (\psi^+)^2 - 2\lambda_0 D_0 \psi^+ \psi^2 \right\} + n_0 \int d\mathbf{x} \psi^+(\mathbf{x}, 0), \quad (34)$$

критическая размерность которого зависит от масштабной размерности поля σ_+ в духе описания трикритического скейлингового поведения, приведенного в работе [2]. Модель оказывается логарифмической в размерности $d = 6$ ввиду того, что везде, кроме коэффициента при члене $(\psi^+)^2$, действие соответствует критической динамике модели φ^3 . Но и в этом случае некоторые несущественные операторы оказываются потенциально опасными и асимптотическое поведение модели описывается следующим эффективным действием.

2. Случай $d_{\psi^+} = d_\psi = d/2$. Оба слагаемых третьего порядка оказываются существенными, и эффективное действие имеет вид (33). В этом случае размерность поля σ_+ превосходит размерность поля $\sqrt{E_{+1}}$, и для простоты можно пренебречь полем σ_+ . При этом эффективное динамическое действие можно записать в виде

$$S = \int_0^\infty dt \int d\mathbf{x} \left\{ -\psi^+ \partial_t \psi + D_0 \psi^+ \nabla^2 \psi - 2\sqrt{2} \sqrt{E_{+1} \lambda_0 D_0} \psi^+ \psi + \frac{E_{-1} \sqrt{E_{+1}}}{\sqrt{2\lambda_0 D_0}} (\psi^+)^2 + E_{-1} (\psi^+)^2 \psi - 2\lambda_0 D_0 \psi^+ \psi^2 \right\} + n_0 \int d\mathbf{x} \psi^+(\mathbf{x}, 0). \quad (35)$$

Заметим, что это действие есть не что иное, как динамическое действие, описывающее грибовский процесс со случайным источником, не зависящим от плотности активного реагента. То, что интенсивность изменения плотности, обусловленная случайным стоком, пропорциональна степени плотности, представляется естественным предположением. Предположение о том, что интенсивность изменения плотности, обусловленная случайным источником, пропорциональна степени плотности, не представляется естественным. Поэтому из динамического действия (35) могут следовать предсказания критического поведения грибовского процесса, отличные от обсуждавшихся в литературе.

В третьем случае, когда $d_{\psi+} > 0$ и $d_{\psi} = 0$, получается эффективное действие (34).

Анализ масштабных размерностей показывает, что можно отказаться от большинства ограничений на распределения вероятностей интенсивностей переходов типа (14) и (15). В самом деле, даже если кумулянты старших порядков оказываются конечными, масштабные размерности соответствующих членов в динамическом действии растут с порядком кумулянта, за исключением случая, когда интенсивность перехода не зависит от плотности реагента.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследованы возможные эффекты влияния случайных источников и стоков на парные реакции аннигиляции $A + A \rightarrow \emptyset$. В отличие от часто используемого подхода, в котором источники и стоки вводятся непосредственно в уравнение Ланжевена, в настоящей работе они прямо включены в управляющее уравнение, в котором их физический смысл становится отчетливо виден. Рассматривались реакции рождения и уничтожения, линейные относительно числа частиц со случайными коэффициентами интенсивности для модели источников и стоков. На основе анализа канонических скейлинговых размерностей построены эффективные действия, являющиеся отправной точкой для ренормгруппового анализа критического поведения рассматриваемой системы. Во всех исследованных случаях влияние случайных источников и стоков на асимптотическое поведение функций Грина при больших временах и расстояниях оказывается существенным и меняет класс универсальности модели. Асимптотическое поведение модели со случайными источниками и стоками, вместо класса универсальности парной реакции аннигиляции $A + A \rightarrow \emptyset$, оказывается принадлежащим классу универсальности грибовских процессов в критическом случае и классу универсальности модифицированного грибовского процесса в критическом пределе для некритической модели. В первом случае снова было показано, что описание стохастического процесса с помощью уравнения Ланжевена существенно отличается от описания в терминах управляющего уравнения. Член со случайным шумом в уравнении Ланжевена отвечает учету влияния настоящих случайных источников и стоков, а не микроскопических степеней свободы средне-масштабного процесса. Здесь классы универсальности одного и того же процесса реакции оказываются совершенно различными в случае управляющего уравнения без источников и стоков, с одной стороны, и в случае уравнения Ланжевена, с другой стороны.

В некритическом случае, когда случайный источник не зависит от плотности реагента, грибовский процесс модифицируется для того, чтобы учесть влияние эффектов критического поведения в режиме, когда источники и стоки асимптотически

убывают. Нами выполнен анализ зависимости скейлинговых функций от параметров вероятностных распределений источников и стоков в ИК-пределе. Результаты напоминают ситуацию, характерную для теории фазовых переходов, в которой статистические корреляции параметров порядка становятся зависимыми от “массы” (отклонения температуры от критического значения); исследование зависимости скейлинговых функций от такой “массы” составляет нашу ближайшую задачу.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Slovak Academy of Sciences, Center of Excellency for Nanofluid of IEP SAS (грант VEGA № 0173), а также программы “Кооперативные явления и фазовые переходы в наносистемах с перспективным использованием в нано- и биотехнологиях” (проекты № 26220120021, 26220120033). Финансирование исследований обеспечивалось European Regional Development Fund. Также работа поддержана Finnish Academy of Science and Letters (грант № FY2010n32).

Список литературы

- [1] M. Doi, *J. Phys. A*, **9**:9 (1976), 1465–1477; 1479–1495.
- [2] А. Н. Васильев, *Квантовополевая ренормгруппа в теории критического поведения и стохастической динамике*, Изд-во ПИЯФ, СПб., 1998.
- [3] N. G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*, North-Holland, Amsterdam, 1984.
- [4] M. Hnatich, J. Honkonen, *Phys. Rev. E*, **61**:4 (2000), 3904–3911.
- [5] А. Н. Васильев, *Функциональные методы в квантовой теории поля и статистике*, Изд-во ЛГУ, Л., 1976.
- [6] В. Н. Грибов, *ЖЭТФ*, **53**:2 (1967), 654–672.
- [7] N. V. Antonov, A. S. Kapustin, *J. Phys. A*, **43**:40 (2010), 405001, 22 pp., arXiv:1006.3133.